

Суть нашего алгоритма в том, что необходимо было вывести зависимость кинетической энергии магических кластеров от температуры при нагревании до точки плавления.

Подготовительный этап:

В основу программы легла формула:

$$\sum E_k = \frac{T \cdot (2 \cdot N - 3) \cdot k}{2},$$

где T – температура, N – число атомов в кластере, $k = 1,380649 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Поскольку при написании кода есть возможность использовать массив, сумму кинетической энергии заменяем на просто кинетическую энергию, т. к. каждому элементу массива будет соответствовать своя кинетическая энергия.

В соответствии с алгоритмом была написана следующего вида программа:

```
import math
import matplotlib.pyplot as plt
t0 = 1000
tmax = 2348
dt = 10
t = np.arange(t0, tmax, dt)
N1 = 7
N2 = 19
def Ek(N, t):
    ek = (t*(2*N-3) * 1.380649*pow(10, -23))/2
    return ek
e1 = Ek(N1, t)
e2 = Ek(N2, t)
plt.plot(t, e1)
plt.plot(t, e2)
```

Последовательно прокомментируем строчки кода:

1. Подключили необходимые библиотеки;
2. Ввели условия для температуры (задали массив от 1000 до 2348 с шагом 10);
3. Ввели 2 переменные, отвечающие за количество атомов в кластерах;
4. Создали функцию для подсчета кинетической энергии. В качестве аргументов взяли количество атомов и температуру;
5. Создали 2 массива, в которые поместили полученные значения функции;
6. Построили графики (рис. 1., рис. 2.):

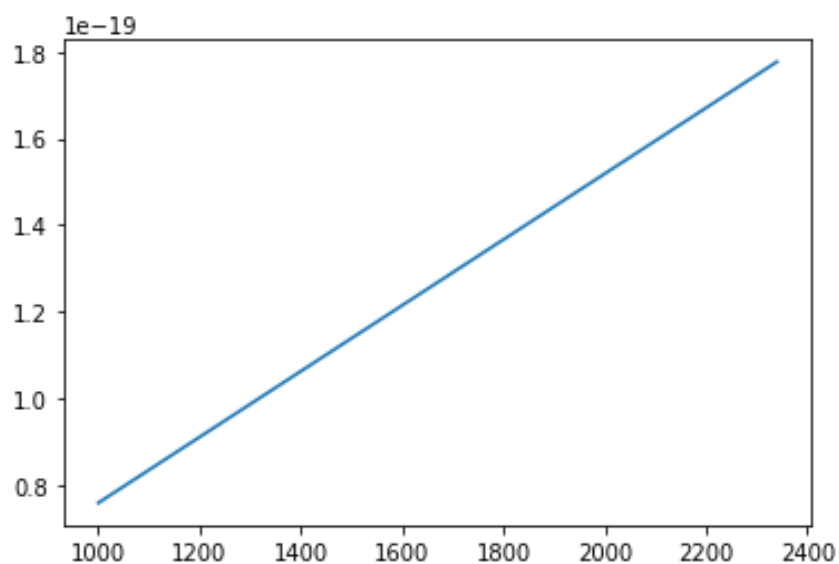


Рис. 1. Для кластера с числом атомов, равным 7

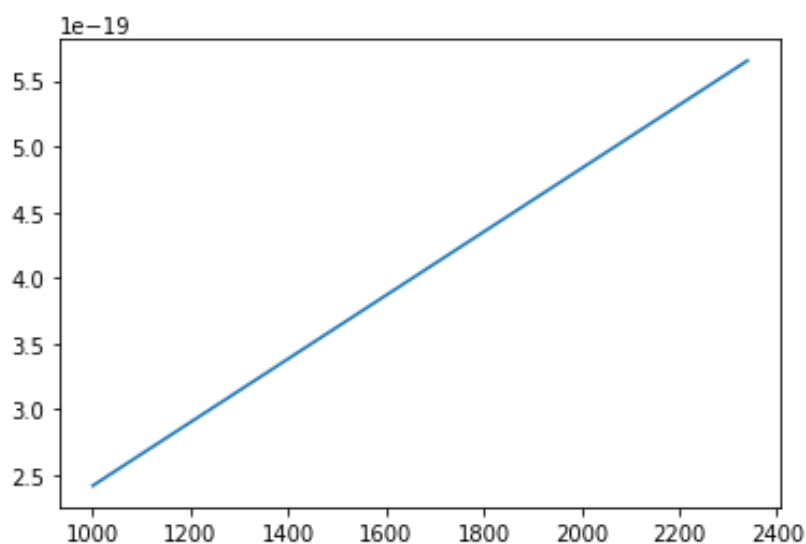


Рис. 2. Для кластера с числом атомов, равным 19

По графикам видно, что кинетическая энергия прямо пропорциональна температуре, т. е. получена линейная функция. Также видим, что при нагреве кинетическая энергия кластеров увеличивается. Для кластера с числом атомов, равным 7, энергия составит $1,8 \cdot 10^{-19}$ Дж, а для кластера с числом атомов, равным 19, – $5,7 \cdot 10^{-19}$ Дж.

Вывод: была написана программа, выводящая зависимость кинетической энергии магических кластеров от температуры при нагревании до точки плавления.